

Sobre la relación de Einstein en gases granulares densos forzados

Vicente Garzó*

*Departamento de Física
Universidad de Extremadura
06071 Badajoz*

La extensión del teorema de fluctuación-disipación a sistemas fuera de equilibrio es uno de los problemas que mayor estudio está recibiendo en los últimos años. En este contexto, la materia granular constituye un buen ejemplo de un sistema que inherentemente se encuentra fuera de equilibrio. Dichos sistemas están constituidos por granos macroscópicos que colisionan inelásticamente de modo que la energía total del mismo disminuye en el tiempo a menos que el sistema reciba energía externamente. Cuando el enfriamiento colisional se compensa con la inyección de energía externa, el sistema alcanza un estado estacionario de no equilibrio. Dicha situación es en la que estamos interesados en esta comunicación.

El teorema de fluctuación-disipación relaciona la respuesta lineal de un sistema en equilibrio con sus correlaciones. En el lenguaje de frecuencias ω , el teorema establece que la función de respuesta a una fuerza armónica débil y la correspondiente función de autocorrelación del observable conjugado de dicha fuerza tienen exactamente la misma dependencia en la frecuencia y además el cociente de las mismas es igual a la temperatura del sistema. Dado que la dependencia completa de dichas funciones con la frecuencia es difícil de evaluar en general, en muchas ocasiones la correspondiente relación entre la fluctuación y la respuesta se determina en el límite de frecuencia cero ($\omega \rightarrow 0$). En este límite, el cociente entre ambas cantidades se conoce como la relación de Einstein.

Aunque algunos avances sobre la teoría de respuesta lineal han sido llevados a cabo en el contexto de la mecánica estadística de fluidos granulares,¹ en este trabajo adoptaremos el punto de vista de la teoría cinética (hipótesis de caos molecular) de modo que las ecuaciones de Boltzmann y de Enskog (para sistemas de densidad moderada) serán el punto de partida. En este trabajo se estudiará la difusión de impurezas en un gas granular forzado cuando la corriente es generada simultáneamente por un gradiente débil de concentración y por la presencia de un campo externo débil que sólo actúa sobre las impurezas. Bajo estas condiciones, el coeficiente de difusión D y de movilidad μ son los coeficientes de transporte relevantes. Además supondremos que el gas es calentado por la acción de fuerzas externas (termostatos) que realizan trabajo sobre el sistema para compensar el enfriamiento colisional. Dos tipos de termostatos serán considerados: (i) una fuerza determinista proporcional a la velocidad de la partícula (termostato gaussiano), y (ii) una fuerza

externa tipo ruido blanco (termostato estocástico). Dado que el sistema está fuera del equilibrio, la relación usual de Einstein no se verifica, es decir,

$$\epsilon = \frac{D}{T\mu} \neq 1,$$

donde T es la temperatura del gas. Sin embargo, algunos resultados obtenidos en simulación de gases diluidos² han mostrado la validez de dicha relación cuando la temperatura del gas T es reemplazada por la temperatura de la impureza T_0 , que en general es distinta de T dada la no equipartición de la energía. Resultados previos³ obtenidos a partir de la ecuación de Boltzmann muestran que en el caso del termostato estocástico las desviaciones de ϵ de la unidad son en general inferiores al 1% si T es sustituido por la temperatura efectiva T_0 , lo cual está de acuerdo con los resultados encontrados en la simulación.² Sin embargo, resultados más recientes de simulación en sistemas densos⁴ donde las correlaciones juegan un importante papel han mostrado una mayor desviación de ϵ con respecto a la unidad. Por ello, el objetivo de este trabajo es estudiar la relación generalizada de Einstein en el contexto de la ecuación de Enskog, la cual despreja las correlaciones entre las velocidades de las partículas antes de colisionar pero tiene en cuenta las correlaciones espaciales debidas a efectos de volumen excluido. Expresiones explícitas de los coeficientes D y μ son obtenidos a partir del método de Chapman-Enskog en la segunda aproximación de Sonine.⁵ A partir de dichos resultados analizaremos la influencia de la densidad sobre la posible violación de la relación (generalizada) de Einstein.

* vicenteg@unex.es

¹ J. W. Dufty and V. Garzó, *J. Stat. Phys.* **105**, 723 (2001); J. W. Dufty, J. J. Brey, and J. Lutsko, *Phys. Rev.* **65**, 051303 (2002); J. W. Dufty, A. Baskaran, and J. J. Brey, *J. Stat. Mech.* L08002 (2007).

² A. Barrat, V. Loreto, and A. Puglisi, *Physica A* **334**, 513 (2004).

³ V. Garzó, *Physica A* **343**, 105 (2004).

⁴ A. Puglisi, A. Baldassarri, and A. Vulpiani, *J. Stat. Mech.* P08016 (2007).

⁵ V. Garzó and J. M. Montanero, *Phys. Rev. E* **69**, 021301 (2004).

⁶ <http://www.unex.es/fisteor/vicente>